

Úvod

str. 1-3

Kapitola 1

str. 5-41

Základní pojmy a představy rovnovážné termodynamiky

1.1. Úvodní pojmy a fyzikální trivia

- 1.1.1. Skupenství látek a stavové rovnice popisující jejich chování
- 1.1.2. Nejjednodušší stavové rovnice plynu
- 1.1.3. Objem atomů a molekul a jejich vztah ke kritickému objemu
- 1.1.4. Vratný a nevratný děj
- 1.1.5. Základní termodynamické funkce za podmínek rovnováhy
- 1.1.6. Specifická tepla c_V a c_P pro rovnovážný děj
- 1.1.7. Základní vztah pro vnitřní energii pro n molů van der Waalovy látky
- 1.1.8. Ekvipartiční teorém a vztahy pro entropii pro n molů látky
- 1.1.9. Definice teploty a mikrostruktura entropie
- 1.1.10. Mikropohled na entropii a vnitřní energii vibrujících jednotek tuhé látky
- 1.1.11. Ilustrace partiční funkce související s míšením a prostorovým přemístěním částic typu A a typu B
- 1.1.12. Vnitřní energie a síly interakce pro uzavřený systém
- 1.1.13. Představa vnější energie otevřeného (průtočného) systému

Literatura

Kapitola 2

str. 42-66

Deformace těles pod vlivem napětí

2.1. Tvar a deformace tuhého tělesa: Hookův zákon

- 2.1.1. Matice napětí
- 2.1.2. Matice diferenciálně malé deformace
- 2.1.3. Vazba lineární úměry mezi maticí napětí a maticí relativní deformace
- 2.1.4. Poissonovy konstanty. Dvojměrná ilustrace
- 2.1.5. Tlaková síla v mechanice kontinua a její odezva relativní objemové změny
- 2.1.6. Tlak a objemová relativní deformace

2.2. Napětí která vznikají v pohybující se Newtonově tekutině

2.3. Rovnice Navier-Stokesova - vazká tekutina v pohybu

- 2.3.1. Voigtův visko-elastický element

2.4. Přejít tuhá látka-kapalin: ztráta střížného modulu

Literatura

Rovnováha a stavy v blízkosti rovnováhy

- 3.1. Podstata specifických tepel**
- 3.2. Základní definiční vztahy specifických tepel pro systémy v rovnováze**
- 3.3. Experimentální hodnoty některých parametrů nejběžnějších typů látek**
 - 3.3.1. Specifická tepla plynů
 - 3.3.2. Závislost objemu tuhé látky, či kapaliny, na tlaku a teplotě
- 3.4. Struktura pevné látky a kapaliny s fyzikálními vlastnostmi harmonického oscilátoru**
 - 3.4.1. Látky s pravidelně uspořádanou strukturou
 - 3.4.2. Dulong –Petitovo pravidlo
 - 3.4.3. Možnost superpozice specifických tepel vzhledem k referenční teplotě
 - 3.4.4. Formy vibrace hmotných center v pevné fázi a souvislost specifického tepla
 - 3.4.5. Kvantování harmonického oscilátoru - teplotně závislé specifické teplo
 - 3.4.6. Debyeův model a spektrum frekvencí
 - 3.4.7. Dvojití řešení Debyeova integrálu pro dvě oblasti teplot
- 3.5. Látky nekystalické: amorfni a skelné**
- 3.6. Stručný výklad nástupu tekutosti: modelová představa**
- 3.7. Specifické teplo za konstantního objemu a jeho vztah k partiční funkci**
- 3.8. Úhrn partičních funkcí základních stavů: tuhá látka, kapalina a plyn**
 - 3.8.1. Partiční funkce tuhé látky
 - 3.8.2. Partiční funkce atomárního plynu
 - 3.8.3. Partiční funkce Turnbull-Eyringova typu pro kapaliny
- 3.9. Shrnutí**
- Literatura**

Základní fázové přechody

- 4.1. Úvod: Základní představa kapaliny a plynu**
- 4.2. Přechod kapalina-pára: semiempirický přístup**
 - 4.2.1. Troutonovo empirické pravidlo a jeho souvislost s rovnicí Clapeyronovou
 - 4.2.2. Individuální charakteristika kapalin a universálnost jejich odpaření: acentrický faktor
 - 4.2.3. Expanse kapaliny do konstantního objemu
 - 4.2.4. Hildebrandovo empirické pravidlo
- 4.3. Částečný micro-pohled na strukturu Troutonova pravidla**
 - 4.3.1. Volný objem kapaliny
 - 4.3.2. Eyringova rovnice
 - 4.3.3. Odvození Eyringovi rovnice
- 4.4. Omezení užití VDW a Eyringovy rovnice**
 - 4.4.1. Omezení vyplývající z rozměru částice
 - 4.4.2. Přibližný vztah pro objem Eyringovy kapaliny odvozený z kritického objemu
 - 4.4.3. Limitní expanse kapaliny- odhad z VDW rovnice
 - 4.4.4. Souvislost volného objemu a objemu kapaliny
 - 4.4.5. Aplikace Eyringovy rovnice k odvození Troutonova pravidla - souvislost volného objemu a enthalpie

- 4.5. Přechody z krystalického stavu do kapaliny zvětšením vibrační amplitudy**
 - 4.5.1. Lindemannova teorie tání
 - 4.5.2. Přechod ze skelného stavu do stavu kapaliny zvětšením vibrační amplitudy
 - 4.6. Stupeň uspořádání látky a řád fázového přechodu**
 - 4.6.1. Fázový přechod druhého řádu a závislost volné energie na vnitřním uspořádání látky (Landauova matematická abstrakce)
 - 4.6.2. Fázový přechod prvního řádu z hlediska uspořádání systému
 - 4.7. Řád fázového přechodu a derivace funkce stavové veličiny - spojitost a nespojitost fázových veličin a jejich derivací**
 - 4.7.1. Změny stavových veličin ve fázových přechodech - změny tepelné roztažnosti a tepelné kapacity
 - 4.7.2. Příčiny tepelné roztažnosti pevných látek
 - 4.7.3. Specifické teplo nelineárního oscilátoru
 - 4.7.4. Závěrečné shrnutí základních představ a modelů specifických tepel
- Literatura**

Kapitola 5

str. 147-168

Difúze a viskozita

- 5.1. Základní pojmy**
 - 5.1.1. Difúze a viskozita
 - 5.1.2. Odlišnost Einsteinova a Debyeova postupu
 - 5.1.3. Praskání struktury - příčné eraticnosti Brownova pohybu
 - 5.1.4. Pohyb částic v prostoru vzorku: Doba úniku částice z původní polohy, doba odezvy okolí částice a vibrační a prostorová nehomogenita
 - 5.1.5. Rychlost difúze a rychlost vibrace částic
 - 5.1.6. Difúze a prasknutí struktury.
 - 5.1.7. Střední migrační vzdálenost a střední doba trvání lavinovitého posuvu
 - 5.1.8. Změny frekvence základních kmitů vyvolané přemístěním částice
 - 5.1.9. Závislost elastické energie W na tlaku a teplotě
 - 5.1.10. Shrnutí
 - 5.2. Kvantová difúze**
 - 5.2.1. Nelineární difúze s chemickou reakcí
 - 5.2.2. Historie periodických samoorganizujících chemických reakcí
 - 5.2.3. Fyzikální podstata procesů
- Literatura**

Kapitola 6

str. 169-230

Neuspořádaný stav a základní představy skelného přechodu

- 6.1. Přechod od ideálně tuhé látky ke kapalině - nejjednodušší vyjádření**
- 6.1.1. Měknutí amorfni látky za nízkého a atmosferického tlaku, vyjádření pomocí jednoduchého reologického modelu
- 6.1.2. Ztráta střižného modulu
- 6.2. Přechod z pevné, amorfni látky vyvolaný změnou teploty**
- 6.2.1. Limitovanost - aproximace elastických konstant získaných s vyloučením času
- 6.2.2. Vztahy platící v těsné blízkosti skelného přechodu (neuvažujeme časový vliv)

- 6.2.3. Vzájemné poměry matematicky propojených konstant elastického Hookova modelu - dílčí vyjádření a tradiční pojetí podle Tobolského vázané k typu látky
 - 6.2.4. Určení elastických konstant ze střední rychlosti šíření akustických vln ve vzájemně kolmém směru v okolí bodu T_g a pro speciální typ deformace vzorku
 - 6.3. Určení jedné z elastických konstant z fyzikálně chemických měření při změně fáze**
 - 6.3.1. Modul kompresibility, κ , určený z experimentálních dat - z hodnot výparné a sublimační energie
 - 6.3.2. Hustota kohezivní energie a hlubší pojetí jejího významu
 - 6.4. Změny fyzikálně chemické povahy u teploty skelného přechodu**
 - 6.4.1. Úvod k jednotlivým zvláštnostem skelného přechodu
 - 6.4.2. Vliv teploty na volný objem a viskozitu
 - 6.4.3. Alternativní odvození rovnice WLF
 - 6.4.4. Odvození rovnice Rosslera
 - 6.4.5. Struktura závislosti viskozity a difuzivity na teplotě
 - 6.4.6. Závislost viskozity na tlaku u T_g přechodu
 - 6.4.7. Závislost viskozity na tlaku i na teplotě - FMT rovnice
 - 6.5. Začlenění časových závislostí**
 - 6.5.1. Pokles elasticity a ztráta střížného modulu na čase v oblasti T_g přechodu
 - 6.5.2. Modul relaxace napětí
 - 6.5.3. Dynamický modul
 - 6.5.4. Dynamická viskozita
 - 6.5.5. Vyjádření relaxačního chování látky pomocí více elementů.
 - 6.5.6. Alternativní přístup zavedení více elementů do vyjádření časového relaxačního chování látky (parametr β^+) a protažení exponenciály
 - 6.5.7. Zavedení empirického parametru, β^+
 - 6.5.8. Viskozita ve stříhu
 - 6.6. Změny amplitudy vibrací u teploty zesklnění a formování skelného stavu**
 - 6.6.1. Nejednoznačnost struktury skelného stavu
 - 6.7. Heterogenita amorfní struktury skel v rámci „medium range order“**
 - 6.7.1. Bloky a předvypařené částice
 - 6.7.2. Odhad rozměrů heterogenity domén z termické analýsy .
 - 6.7.3. Odhad velikosti domén z velikosti polarizibility segmentů a z relaxačních měření
 - 6.7.4. Určení velikosti domén z nepravidelnosti rozložení a z hustoty vibračních spektrálních frekvencí
 - 6.8. Heterogenita děr a heterogenita volného objemu amorfní látky u T_g přechodu**
 - 6.8.1. Vznik velkých dutin
 - 6.8.2. Oblast nad Vogelovou teplotou a pod teplotou T_g
 - 6.8.3. Oblast nad teplotou T_g a pod teplotou T_{cr}
 - 6.9. Strukturalizace entropie dle Johariho (rovnovážný vztah)**
 - 6.9.1. Několik poznámek vyplývajících z experimentálních měření
 - 6.9.2. Změny entropie v okolí teploty skelného přechodu
 - 6.10. Teplota zesklnění T_g a chemická struktura látky**
 - 6.11. Chování amorfní látky za nízké teploty**
- Literatura**

Nelineární prvky mechaniky a termodynamiky materiálů

- 7.1. Úvod**
- 7.1.1. Otevřený a uzavřený systém
- 7.1.2. Vlastnosti látek
- 7.2. Bilance hmotnosti průtočného systému, bez rozlišení individuálních složek**
- 7.2.1. Bilance
- 7.2.2. Jednoduchý a dvojitý skalární součin
- 7.2.3. Bilance hybnosti aplikovaná v mechanice kontinua
- 7.2.4. Bilance mechanické energie
- 7.2.5. Celková bilance energie průtočného elementu
- 7.3. Bilance systému o několika složkách**
- 7.3.1. Vícesložkové systémy
- 7.3.2. Součet kinetické energie toku a kinetické energie difúze - formy vyjádření
- 7.3.3. Vznik a zánik jednotlivých složek chemickou reakcí v diferenciálně malém elementu
- 7.3.4. První věta termodynamická zahrnující výměnu hmoty ve složkách
- 7.3.5. Jednorozměrný případ ne-konvektivní migrace s chemickou reakcí
- 7.4. Souhrn**
- 7.4.1. Bilance hmoty ve složkách - hmotové podíly
- 7.4.2. Pohybová rovnice součtu složek
- 7.4.3. Práce síly na systém
- 7.4.4. Bilance energie zahrnutím tepelného toku, q'
- 7.5. Energie vyjádřená formou součinu toků a sil**
- 7.5.1. Rozlišení externí a interní entropie
- 7.5.2. Interní entropie v chemické reakci a v uzavřeném systému
- 7.5.3. Souběžné chemické reakce
- 7.5.4. Produkce entropie - příklady pro mechanické a analogické elektrické systémy
- 7.6. Oscilace termodynamických veličin**
- 7.6.1. Linární oscilátor a mikropohyb hmoty charakterizující skupenství
- 7.7. Nelineární oscilátory a jejich využití pro popis strukturních změn
- 7.7.1. Příklad zdvojení potenciální jámy přidáním koeficientů
- 7.7.2. Variace koeficientů potenciální jámy - případ zavěšeného kyvadla s nelineární výchylkou
- 7.7.3. Nelineárnost problému vznikající provázaností dvou diferenciálních rovnic a jejich zobrazení
- 7.7.4. Rovnice Van Polova
- 7.7.5. Jednoduchý vynucený oscilátor Rossler -Uedova typu
- 7.7.6. Chaotický oscilátor
- 7.7.7. Oscilační nelineární systémy a charakterizující pohyb molekul nad teplotou T_{cr} .
- 7.8. Fluktuace vibračních pohybů**
- Literatura**

Stavové rovnice ve stavu rovnováhy

- 8.1. Základní typy rovnic polynomu třetího stupně**
- 8.1.1. Rovnice s trojnásobným kořenem kritického objemu, V_c

- 8.1.2. Stavová rovnice nejpůvodnější – vyjádření podle van der Waalsa
- 8.1.3. Grafické vyjádření stavových rovnic.
- 8.1.4. Stručná fyzikální charakteristika nejtypičtějších vlastností látek určených ke zkoumání pomocí stavových rovnic
- 8.1.5. Bližší pohled na strukturu parametru rozpustnosti δ^{\oplus}
- 8.1.6. Některé novější stavové rovnice
- 8.2. Vyčíslení individuálních parametrů stavových rovnic**
- 8.3. Přibližný odhad číselných hodnot koeficientů $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ ve stavových rovnicích**
- 8.4. Starší typy stavových rovnic a jejich vztah ke kritickým parametrům látky**
- 8.4.1. Přehled souhrnných hodnot pro dvou parametrické stavové rovnice staršího typu
- 8.5. Bližší pohled na rovnici Peng-Robinsona**
- 8.6. Jednoduché fyzikální souvislosti indikované z kubických rovnic**
- 8.6.1. Logaritmický vztah závislosti tlaku nasycených par na převrácené hodnotě teploty
- 8.6.2. Koeficient teplotní roztažnosti kapaliny
- 8.6.3. Koeficient stlačitelnosti kapalin κ a charakteristický poměr $\frac{V \alpha^2}{\kappa}$

Literatura

Kapitola 9

str. 311-330

Revize základních pojmů termiky

- 9.1. Úvod**
- 9.2. Dvouparametrický systém, konjugované parametry**
- 9.2.1. Diatermický (tepelný) kontakt
- 9.2.2. Adiabatická přepážka
- 9.2.3. Residuální charakter termických veličin a pojmů
- 9.3. Definice tepelné rovnováhy**
- 9.3.1. Termoskop a termoskopický stav
- 9.3.2. *Ad hoc* definice teploty
- 9.3.3. Nultý zákon termodynamiky
- 9.4. Fixní termometrické body**
- 9.4.1. Empirické vlastnosti fixních termometrických bodů
- 9.4.2. Konstrukce empirické teplotní stupnice
- 9.4.3. Sešívání lokálních teplotních stupnic
- 9.4.4. Absolutní teplotní stupnice
- 9.5. Carnotův princip**
- 9.5.1. Kalibrace Carnotovy funkce pomocí expanse Boyleova plynu
- 9.6. Kritika principu ekvivalence tepla a práce**
- 9.6.1. Kalorická teorie tepla
- 9.6.2. Porovnání dynamické a kalorické teorie tepla
- 9.7. K realizaci teplotní stupnice ideálního plynu**
- 9.7.1. Ideální plyn za nízkých teplot
- 9.8. Shrnutí**
- Literatura**

Seznam symbolů

str. 331